

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 519.62/.64
N госрегистрации 01201356261

УТВЕРЖДЕН
Протоколом заседания
Ученого совета
от 17.02.2015 № 3/2015

Председатель Ученого совета
член-корреспондент РАН
_____ В. В. Шайдуров
" ___ " _____ 2015 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

БАЗОВЫЙ ПРОЕКТ IV.36.1.3 "РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ
СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ, ИХ АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ И ПРОГРАММНАЯ
РЕАЛИЗАЦИЯ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ВЫСОКОЙ
ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ" ПРОГРАММЫ СО РАН IV.36.1. "НОВЫЕ РЕШЕНИЯ
ПРОБЛЕМ ИССЛЕДОВАНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
СЛОЖНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ В
ЗАДАЧАХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ, АВТОМАТИЗАЦИИ И УПРАВЛЕНИЯ". № ГОС.
РЕГИСТРАЦИИ 01201356261.

(промежуточный)

Руководитель темы
д.ф.-м.н., профессор

_____ В.М. Садовский
" ___ " _____ 2015 г.

Красноярск 2015

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы д.ф.-м.н., профессор	_____	В.М. Садовский
	(подпись, дата)	
Исполнители: зав. отделом, к.ф.-м.н.	_____	Е.Д. Карпова
	(подпись, дата)	
г.н.с., д.ф.-м.н.	_____	Е.А. Новиков
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	А.Н. Рогалев
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	Е.С. Кирик
	(подпись, дата)	
в.н.с., д.т.н.	_____	К.В. Симонов
	(подпись, дата)	
в.н.с., д.ф.-м.н.	_____	В.А. Кочнев
	(подпись, дата)	
с.н.с., д.ф.-м.н.	_____	Л.И. Шкутин
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	А.Д. Матвеев
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	О.В. Садовская
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	И.В. Киреев
	(подпись, дата)	
н.с., к.ф.-м.н.	_____	М.П. Варыгина
	(подпись, дата)	
инженер	_____	А.А. Горохов
	(подпись, дата)	
инженер	_____	И.В. Смолехо
	(подпись, дата)	
инженер	_____	Е.П. Ченцов
	(подпись, дата)	
Нормоконтролер	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	

РЕФЕРАТ

Отчёт 27 с., 13 рис., 2 табл., 2 прил.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ДЕФОРМИРУЕМАЯ СРЕДА, МИКРОСТРУКТУРА, ГЕОМОНИТОРИНГ, СЕЙСМОМЕТРИЯ, ГРАВИМЕТРИЯ, ПРИЛИВНЫЕ ТЕЧЕНИЯ, ПОВЕРХНОСТНЫЕ ВОЛНЫ

Цель работы состоит в разработке эффективных методов численной реализации сложных математических моделей природных и технологических процессов и систем на высокопроизводительных ЭВМ кластерной архитектуры и суперкомпьютерах с графическими ускорителями.

В результате проведенных исследований разработаны математические модели, алгоритмы и программы для численного анализа деформационных процессов в структурно неоднородных средах (геоматериалах) и композитах на многопроцессорных вычислительных системах. С применением высокопроизводительных вычислений развита технология обработки и интерпретации геолого-геофизических данных сейсмометрии и гравиметрии; созданы вычислительные методики для анализа предвестников-структур подготовки сильного землетрясения в выделенной очаговой области и для решения прямых и обратных задач в проблеме опасности цунами. Разработаны методы прогнозного моделирования многолетней динамики состояния экосистем меромектических озер Сибири; методы исследования магнитных эффектов в биологически значимых системах и методы восстановления характеристик течения в больших акваториях по данным наблюдений за возвышением свободной поверхности на части открытой границы. Выполнен комплекс работ по технической поддержке высокопроизводительной вычислительной техники и по обеспечению удаленного доступа пользователей к вычислительным ресурсам Института.

Степень внедрения: результаты исследований опубликованы в рецензируемых отечественных и зарубежных научных изданиях.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
1 Математическое и численное моделирование деформационных процессов в структурно неоднородных средах (геоматериалах) и композитах на многопроцессорных вычислительных системах	6
2 Развитие технологий обработки и интерпретации геолого-геофизических данных сейсмометрии и гравиметрии. Разработка вычислительной методики для анализа предвестников-структур подготовки сильного землетрясения для выделенной очаговой области.....	8
3 Разработка методов решения прямых и обратных задач в проблеме опасности цунами на высокопроизводительной вычислительной технике.....	9
4 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 56 «Прогнозное моделирование и междисциплинарные комплексные исследования многолетней динамики состояния экосистем меромектических озер Сибири» (№ гос. регистрации 0120135150). Исследование вертикальной структуры меромектического озера.....	11
5 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 71 «Магнитные эффекты в биологически значимых системах» (№ гос. регистрации 01201259038). Численное моделирование кинетики процесса перекисного окисления липидов, включающее как радикальные (реакции рекомбинации радикалов), так и не радикальные стадии этого процесса с учетом его цепного характера и влияния магнитного поля на радикальные стадии.....	13
6 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 130 «Математические модели, численные методы и параллельные алгоритмы для решения больших задач СО РАН и их реализация на многопроцессорных суперЭВМ» (№ гос. регистрации 01201260202). Проведение численных экспериментов и сравнительного анализа эффективности нескольких реализаций параллельного программного обеспечения для решения задачи о восстановлении граничной функции в открытой морской акватории по данным наблюдений.....	15
7 Продолжение работ по плану Программы Президиума СО РАН «Высокопроизводительные вычисления СО РАН».....	19
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	23
ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	24
ПРИЛОЖЕНИЕ Б.....	27

ВВЕДЕНИЕ

Проблема разработки вычислительных технологий для решения ресурсоемких научно-исследовательских и прикладных задач на суперкомпьютерах высокой производительности имеет очень большое значение. Это связано с постоянным совершенствованием применяемых математических моделей и определяется возрастающими требованиями к точности результатов моделирования. Необходимую техническую базу для реализации таких технологий обеспечивает ускоренный темп роста производительности суперкомпьютеров, достигшей в настоящее время десятков петафлопс, с перспективой создания ЭВМ эксафлопсной производительности. В Институте вычислительного моделирования СО РАН имеются все предпосылки (сложившиеся коллективы специалистов в области математического моделирования и разработчиков параллельных вычислительных алгоритмов и программ, а также необходимая техническая база) для выполнения исследований, соответствующих мировому уровню в данном научном направлении.

1 Математическое и численное моделирование деформационных процессов в структурно неоднородных средах (геоматериалах) и композитах на многопроцессорных вычислительных системах

Для исследования процессов распространения волн напряжений и деформаций в микроразрушенных горных породах геологических разломов разработана новая математическая модель неустойчивого динамического деформирования структурно неоднородных материалов. В линейном приближении модель формулируется относительно продольного перемещения или касательного напряжения в форме дифференциального уравнения в частных производных третьего порядка параболического типа. Исследовано дисперсионное уравнение модели, описывающее точные решения типа монохроматических волн. Для численного решения задачи Коши построена неявная разностная схема типа предиктор–корректор с контролируемой диссипацией энергии, которая реализована в виде компьютерной программы в среде Matlab. Выполнены стадии отладки, тестирования и верификации программы. Разработанная модель применяется к анализу механизмов внезапного динамического выброса запасенной упругой энергии горными породами, имеющими блочную структуру, при закритическом неустойчивом деформировании межблочных прослоек.

Математические модели динамики микрополярных анизотропных (отротропных) упругих тонких балок с независимыми полями перемещений и вращений, предложенные чл.-корр. НАН РА С.О. Саркисяном, приведены к симметричной гиперболической по Фридрихсу форме, позволяющей эффективно применять вычислительные алгоритмы для решения динамических задач.

При численном решении используется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным и времени. На этапах расщепления задачи применяется схема Годунова типа предиктор–корректор для решения дифференциальных уравнений в частных производных и схема Кранка–Николсон для решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Реализованы последовательные и параллельные версии алгоритмов. Параллельная версия программы предназначена для суперкомпьютеров с графической архитектурой (технология CUDA).

Получено численное решение одномерных задач в рамках исследуемых моделей с учетом и без учета поперечных сдвиговых деформаций. Выполнены расчеты полей напряжений в микрополярной упругой тонкой балке, вызванных воздействием импульсных и периодических нагрузок. Для верификации алгоритма и программы использовалось аналитическое решение задачи о распространении монохроматической

волны в стержне. Исследована задача об определении частот свободных колебаний микрополярной ортотропной упругой тонкой балки. Показано, что в микрополярном стержне имеется собственная частота колебаний, не зависящая от его размера.

Выполнены исследования, направленные на развитие технологии метода конечных элементов при решении больших задач моделирования деформации микронеоднородных и композиционных материалов.

Разработана процедура построения в локальных системах координат двухсеточных криволинейных конечных элементов для расчета пространственных композитных цилиндрических панелей и оболочек. При построении используются две вложенные ортогональные криволинейные сетки: мелкая и крупная. Мелкая сетка порождается базовым разбиением, которое учитывает неоднородную структуру материала. На базовом разбиении строится функционал полной потенциальной энергии в матричной форме. С помощью методов интерполяции определяется проекция функционала энергии на крупную сетку, минимизация которого дает основные конечноэлементные уравнения.

Разработаны процедуры построения сложных многосеточных конечных элементов для расчета трехмерных упругих тел с неоднородной и микронеоднородной структурой. В частности, разработаны криволинейные сложные конечные элементы для расчета пространственных композитных цилиндрических панелей и оболочек.

Преимущества предлагаемых конечных элементов в том, что они:

- описывают пространственное напряженно-деформированное состояние тонкостенных неоднородных и микронеоднородных элементов конструкций без дополнительных предположений о малости толщины;
- учитывают неоднородную и микронеоднородную структуру композитных тел (в том числе, цилиндрических панелей и оболочек);
- учитывают сложный характер закреплений;
- порождают дискретные модели, размерности которых в $10^2 \div 10^4$ раз меньше размерностей базовых моделей, что приводит к существенному сокращению времени счета задач.

Для примера на рисунке 1 приведена типичная схема двухсеточного разбиения и результаты расчета цилиндрической композитной панели под действием собственного веса.

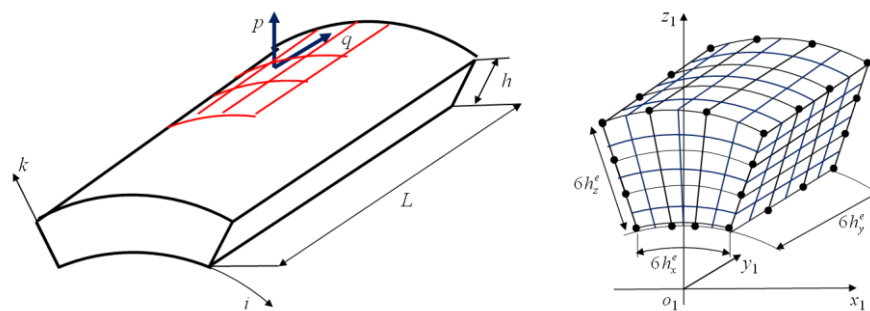


Рисунок 1 – Конечноэлементный расчет цилиндрической панели: схема нагружения и двухсеточное разбиение фрагмента панели

2 Развитие технологий обработки и интерпретации геолого-геофизических данных сейсмометрии и гравиметрии. Разработка вычислительной методик для анализа предвестников-структур подготовки сильного землетрясения для выделенной очаговой области

На основе адаптивных методов решения прямых и обратных задач развита вычислительная технология обработки и интерпретации сейсмических данных в сложных геолого-геофизических условиях. Подготовлены к широкому внедрению программные комплексы для решения задач гравиметрии и магнитометрии ADG-3D и ADM-3D, реализующие эту методику.

Разработана вычислительная методика для анализа предвестников-структур подготовки сильного землетрясения для выделенной очаговой области территории водохранилищ крупных ГЭС Алтай–Саянской сейсмоактивной области.

Модифицирован метод геометрического анализа изображений применительно к пространственным данным геомониторинга очаговой областей Алтай-Саянской сейсмоактивной области, основанный на шиарлет- и вейвлет-преобразованиях, повышающий точность выделения изучаемых линейных структур (предвестников) и визуальное качество изображений изучаемых объектов путем выбора соответствующего алгоритма шиарлет-преобразования в зависимости от решаемой задачи. Показано, что применение модифицированного алгоритма FFST (Hauser, 2013) эффективно для выделения контура объектов на изображении, указанный модифицированный алгоритм сравним по точности с классическими алгоритмами Собела и Превитта. Алгоритм Shearlet toolbox (Easley, Labate, 2013) наиболее эффективен для решения задач шумоподавления изображения. Алгоритм Shearlab (Kutyniok, Lim, 2011) эффективен для решения задачи разделения изображений и шумоподавления.

3 Разработка методов решения прямых и обратных задач в проблеме опасности цунами на высокопроизводительной вычислительной технике

Разработана вычислительная методика анализа данных мониторинга очаговых цунамигенных зон и данных вычислительных экспериментов по распространению цунами в океане. Проведены экспериментальные исследования методики численного моделирования цунами для реальных акваторий на основе вычислительной технологии MOST-CUDA на примере Чилийского землетрясения и цунами 01.04.2014 с магнитудой подводного землетрясения $M = 8.2$.

В рамках вычислительного эксперимента выполнялись следующие процедуры:

- оценка очага цунамигенного землетрясения;
- оценка параметров источника цунами;
- поиск и выбор локального набора гидрофизических станций регистрации цунами в ближней зоне от источника цунами;
- анализ данных регистрации волнового процесса на гидрофизических станциях;
- численное моделирование распространения волны от источника цунами, сравнительный анализ результатов счета и данных регистрации;
- анализ распределения энергии волны цунами для оценки опасности цунами.

На рисунке 2 представлен основной результат численного моделирования Чилийского

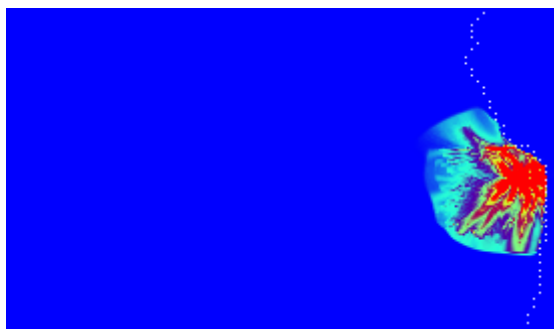


Рисунок 2 – Карта-схема распределения максимальной энергии цунами от цунамигенного землетрясения в районе побережье Чили (01.04.2014, $M = 8.2$)

цунами. Получена карта-схема распределения максимальной энергии цунами, которая позволяет с хорошей точностью и заблаговременностью решать задачу оценки опасности цунами для защищаемых участков береговой зоны.

Продолжены исследования в области компьютерного моделирования движения людей

при возникновении стихийных природных и техногенных чрезвычайных ситуаций (землетрясений, цунами, пожаров) для расчета времени эвакуации из зданий и

сооружений. Современная нормативная база ЧС стимулирует применение расчетных методов, поэтому их развитие с последующей программной реализацией крайне актуально. Создание математической модели, численной и программной реализации сопряжено с обязательным этапом тестирования и валидации. К настоящему моменту отсутствуют стандартизированные методы валидации программ, реализующих моделирование эвакуации. На текущем этапе работа была посвящена формированию тестов, подбору подходящих экспериментальных данных из открытых источников, применению этих методов к тестированию разрабатываемой модели, анализу результатов и коррекции модели.

Тестирование программных модулей проводилось в режиме соотнесения данных вычислительного эксперимента с качественными и количественными результатами многократных натурных экспериментов, в которых наблюдалось устойчивое движение массы людей на характерных участках пути. Такими участками считаются: прямой участок с периодическими и открытыми граничными условиями, сужение (в том числе за счет проемов) участка пути, наличие поворота на 90 и 180 градусов, движение по лестнице, слияние нескольких участков.

Предложен ряд тестов для прямых участков пути и сужений. Описаны условия проведения тестов, результаты которых можно использовать для идентификации параметров модели, разработана технология вычислительного эксперимента.

Апробирование тестов проводилось на примере программного модуля, реализующего разрабатываемую дискретно-непрерывную модель движения людей SIGMA.CD индивидуально-поточного типа. Для примера на рисунке 3 представлены результаты

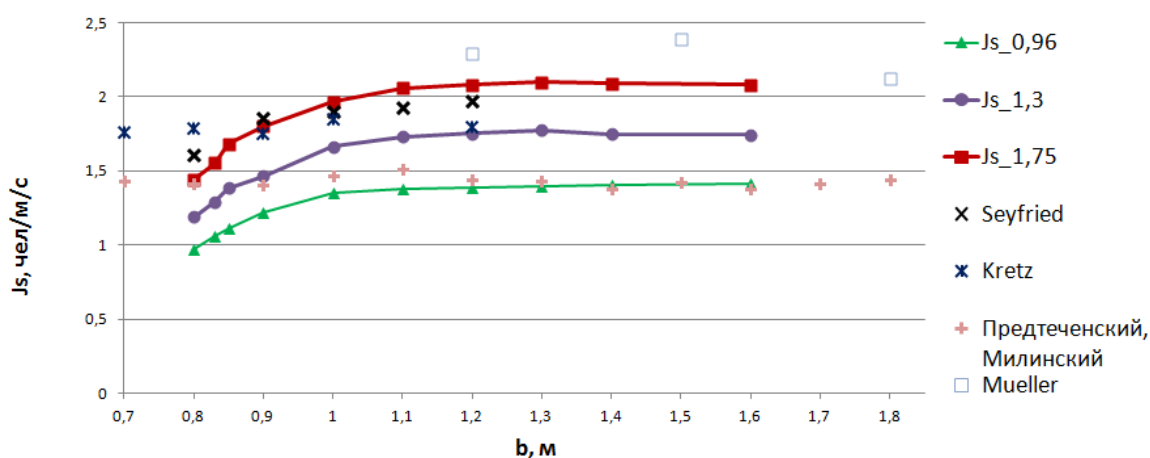


Рисунок 3 – Зависимость величины удельного потока с изменением ширины проема b : модельные данные и данные натурных экспериментов

вычислительного эксперимента (для разных скоростей свободного движения ($J_s_{0,96}$; $J_s_{1,3}$; $J_s_{1,75}$), проведенного в соответствии с тестом по определению зависимости удельного потока от ширины проема b , [м], и данные натуральных экспериментов разных авторов (<http://ped-net.org>).

4 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 56 «Прогнозное моделирование и междисциплинарные комплексные исследования многолетней динамики состояния экосистем меромиктических озер Сибири» (№ гос. регистрации 0120135150).
Исследование вертикальной структуры меромиктического озера

Впервые на основе технологии вычислительного эксперимента создана система компьютерного моделирования ветровых течений в неглубоких соленых замкнутых стратифицированных озерах, включающая в себя обработку и анализ результатов натуральных наблюдений и результатов численных экспериментов (рисунок 4).



Рисунок 4 – Схема комплексной системы моделирования

Оценка общих закономерностей течения проводится на основе аналитических решений упрощенных математических моделей. Входными данными для трехмерного численного моделирования течений являются результаты натурных наблюдений (батиметрия, скорость и направление ветра, поля температуры и солености). На первом этапе выполняется предобработка данных с помощью специально разработанных программ. Далее проводится вычислительный эксперимент с последующим сравнением результатов численного моделирования с натурными данными (скорости, наличие и вид внутренних волн).

Комплексное исследование гидрофизических характеристик озера Шира с применением средств математического моделирования и технологии вычислительного эксперимента позволило: обосновать возможность появления внутренних волн в озере Шира в летний период; выявить существенно трехмерный характер течения в озере с образованием при определенных метеорологических условиях горизонтальных вихревых структур.

Многие соленые озера относятся к меромиктическим, в которых в течение как минимум одного года водная толща не перемешивается до дна. В стратифицированном озере выделяют верхний (эпилимнион) и глубинный (гиполимнион) слои, в которых градиенты плотности малы. Между ними располагается слой воды (металимнион), в пределах которого градиент плотности велик. В непроточном водоеме под действием ветра образуются ветровые течения (рисунок 5). Возможны два типа ветровых течений (в вертикальной

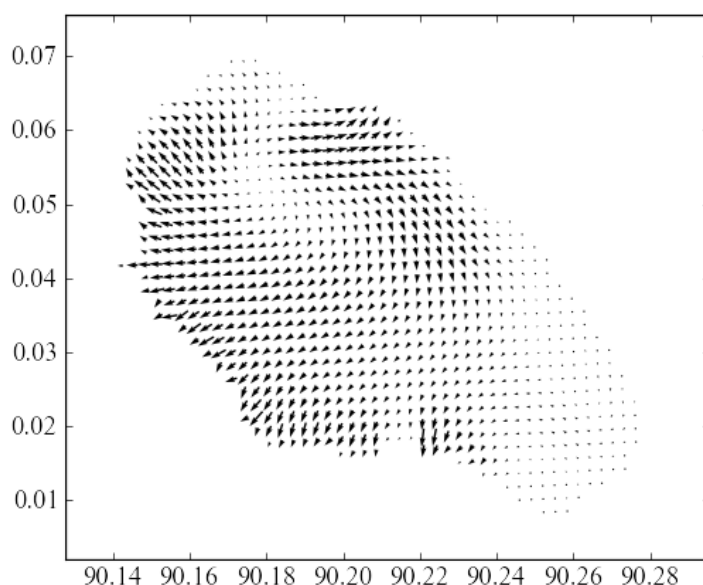


Рисунок 5 – Структура течения на поверхности озера Шира при западном ветре 6 м/с после 7 часов расчета

плоскости): в зависимости от плотностной стратификации и силы ветра формируются одна или две циркуляционные зоны. Представляет интерес получение критерия, определяющего условие смены режима ветровых течений в стратифицированных озерах. Предлагается гипотеза: реализуется перемешивание водной толщи до дна, если характерная скорость течения воды превышает фазовую скорость внутренних волн. Получена формула для определения условий смены режимов ветровых течений в стратифицированных озерах. Приведены примеры расчетов по определению величины ветра, при котором нарушается меромиктия озера Шира.

5 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 71 «Магнитные эффекты в биологически значимых системах» (№ гос. регистрации 01201259038). Численное моделирование кинетики процесса перекисного окисления липидов, включающее как радикальные (реакции рекомбинации радикалов), так и не радикальные стадии этого процесса с учетом его цепного характера и влияния магнитного поля на радикальные стадии

С помощью метода математического моделирования исследовано влияние внешнего магнитного поля на кинетику рекомбинации радикалов. Полученные результаты актуальны для понимания механизма опосредуемых радикалами магнитных эффектов в биологических мембранах, в частности, механизмов перекисного окисления липидов. На рисунке 6 с использованием ранее вычисленных кинетических коэффициентов приведен

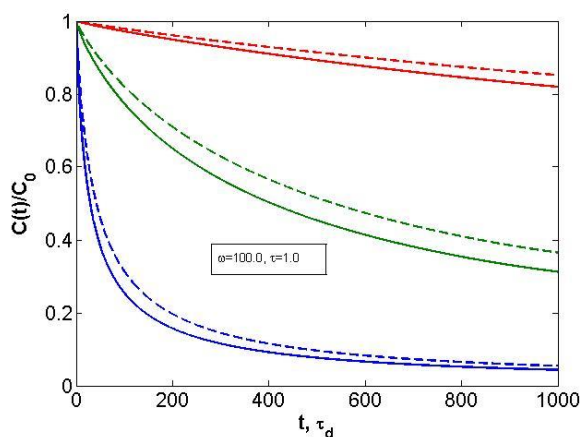


Рисунок 6 – Зависимость концентрации радикалов от времени в случае Δg эффекта и диффузионного контроля реакции рекомбинации

расчет концентрационной зависимости радикалов от времени в магнитном поле и в его отсутствии при следующих значениях параметров: $\omega\tau_d = 1$, время релаксации $T = \tau_d$, концентрация в единицах $1/R^2$, где R – расстояние между липидными радикалами в контакте, начальная концентрация радикалов $C_0 = 1/6000$ (верхняя пара кривых), $1/600$

(средняя пара кривых) и $1/60$ (нижняя пара кривых). Штриховая линия на рисунке 6 характеризует кинетику в отсутствии магнитного поля, сплошная линия – кинетику в магнитном поле

Результаты расчетов на рисунке 6 относятся к магнитным эффектам, обусловленным Δg механизмом. На рисунке 7 этот механизм отсутствует. В расчетах

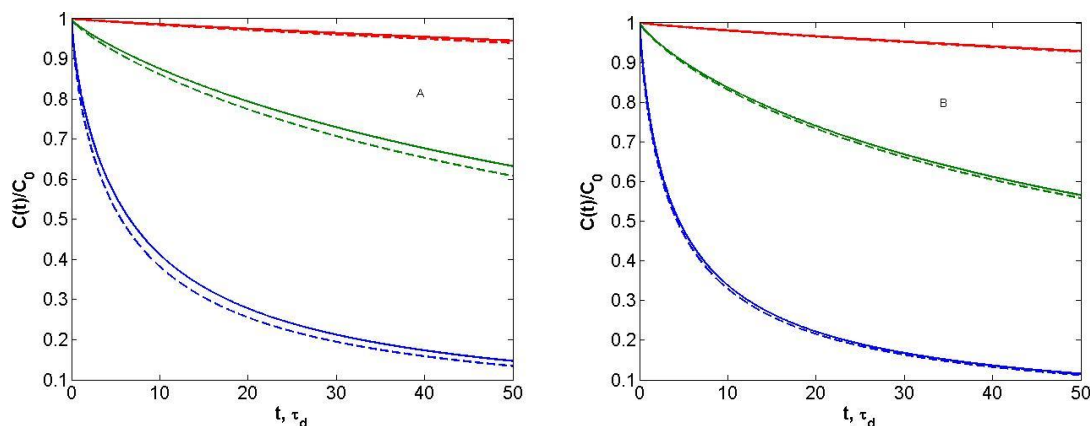


Рисунок 7 – Зависимость концентрации радикалов от времени в случае диффузионного контроля реакции рекомбинации при $\Delta g = 0$

константа сверхтонкого взаимодействия в каждом радикале равна 0.5 мТ. Приняты следующие значения параметров: время спиновой релаксации 1000 нс (слева на рисунке 7), 100 нс (справа на рисунке 7), $\tau_d = R^2/D$, $R = 10 \text{ \AA}$, $D = 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}$, концентрация в единицах $1/R^2$, где R – расстояние между липидными радикалами в контакте ($R = 10 \text{ \AA}$), начальная концентрация радикалов $C_0 = 1/6000$ (верхняя пара кривых), $1/600$ (средняя пара кривых) и $1/60$ (нижняя пара кривых). Штриховая линия описывает кинетику в отсутствии магнитного поля, сплошная линия – кинетику в сильном магнитном поле.

Исследован также магнитный эффект в радикальной кинетике с учетом стадий рекомбинации и разветвления. Решалось следующее интегро-дифференциальное уравнение для концентрации радикалов:

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\int_0^t K(t-\tau) C^2(\tau) d\tau + k_{br} C(t).$$

Результаты расчета приведены на рисунке 8. Параметры расчета: $\omega\tau_d = 1$, время релаксации $T = \tau_d$, концентрация измеряется в единицах $1/R^2$, где R – расстояние между липидными радикалами в контакте, начальная концентрация радикалов в этих единицах

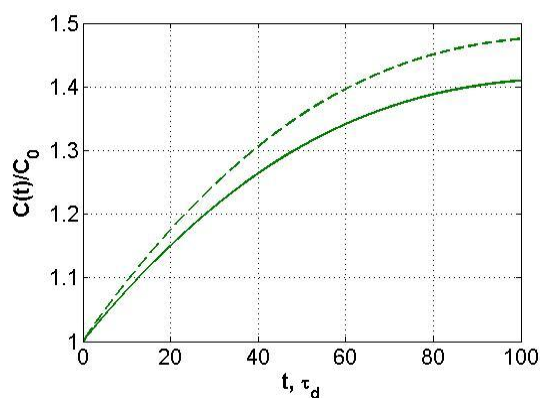


Рисунок 8 – Зависимость концентрации радикалов от времени в случае Δg эффекта и диффузионного контроля реакции рекомбинации со стадией разветвления

$C_0 = 1/600$, константа скорости разветвления $k_{br} = k_d/300$, где k_d – диффузионно-контролируемая константа скорости для двумерного случая. Штриховая линия соответствует кинетике в отсутствии магнитного поля, сплошная линия – кинетике в магнитном поле. Из рассмотрения рисунка 8 видно, что концентрация радикалов растет во времени, но этот рост слабее в случае сильного магнитного поля, чем в случае нулевого магнитного поля. Данный эффект является следствием того, что скорость стадии рекомбинации в случае Δg механизма в сильном магнитном поле больше скорости рекомбинации в нулевом магнитном поле.

6 Продолжение работ по плану междисциплинарного проекта № 130 «Математические модели, численные методы и параллельные алгоритмы для решения больших задач СО РАН и их реализация на многопроцессорных суперЭВМ» (№ гос. регистрации 01201260202). Проведение численных экспериментов и сравнительного анализа эффективности нескольких реализаций параллельного программного обеспечения для решения задачи о восстановлении граничной функции в открытой морской акватории по данным наблюдений

Для осредненных по глубине уравнений приливной динамики рассмотрена обратная задача на восстановление граничной функции, описывающей влияние океана на открытую границу вычислительной области. Для ее решения на каждом шаге по времени разработан и обоснован итерационный алгоритм восстановления вектора скорости и возвышения свободной поверхности во всей расчетной области по данным наблюдений за возвышением свободной поверхности, заданным на части границы открытой (рисунок 9).

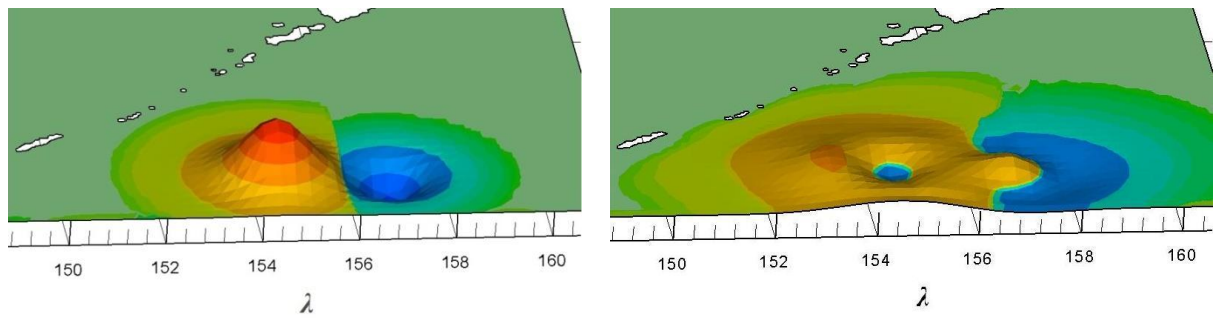


Рисунок 9 – Восстановление возвышения свободной поверхности вблизи границы области в начальный момент времени $t=0$ (слева) и $t=7$ минут (справа)

На каждом шаге по времени ищется решение задачи, которое на границе в смысле наименьших квадратов наиболее хорошо приближает данные наблюдений. Поскольку обратная задача является некорректно поставленной, то рассмотрено несколько вариантов регуляризаторов функционала, которые берутся в виде взвешенных норм восстанавливаемой функции в пространствах L_2 , H^1 , $H^{1/2}$, причем норма определяет пространство, в котором восстанавливается искомая граничная функция.

С целью выбора наиболее эффективной реализации алгоритма были исследованы две различных итерационных схемы на основе методов решения некорректных задач и три способа выбора основного итерационного параметра. Итерационный параметр γ выбирался методом подбора, минимальных невязок (МН) и методом из теории экстремальных задач (ТЭЗ). Отметим, что метод МН является наиболее вычислительноемким и трудоемким в реализации, поскольку требует на каждой итерации дополнительного решения прямой и сопряженной задач. В методе ТЭЗ требуется на каждом шаге итерации дополнительно вычислять отношение норм уже найденных решений. При подборе γ не нужно проводить дополнительных вычислений, поскольку параметр полагается постоянным.

Результаты численных экспериментов по скорости сходимости предложенного итерационного алгоритма в случае использования итерационных схем 1 и 2 и трех видов итерационных параметров γ приведены в таблице 1. Исследованы возможности

Таблица 1. Количество итераций, требующихся для сходимости итерационного алгоритма при восстановлении по данным наблюдений различной гладкости

Пространство восстановления d	Итерационная схема	Данные наблюдений	γ по МП	γ по МН	γ по ТЭЗ
d из L_2	Схема 1, 2	гладкие	9	3	9
		с пропуском	9	3	9

		зашумленные	9	3	19
d из H^1	Схема 1	гладкие	93	25	44
		с пропуском	122	25	34
	Схема 2	гладкие	45	57	24
		с пропуском	60	81	29
d из $H^{1/2}$	Схема 1, 2	гладкие	11	9	60
		с пропуском	13	9	58
		зашумленные	45	32	50

восстановления граничной функции d в пространствах L_2 , H^1 , $H^{1/2}$ с использованием данных наблюдений различной гладкости (гладких, с наложенным белым шумом, с пропусками).

Из таблицы 1 видно, что метод для вычисления оптимального итерационного параметра γ следует выбирать в зависимости от пространства восстановления граничной функции. При восстановлении d из L_2 лучший результат по скорости сходимости достигается при выборе γ методом минимальных невязок, при восстановлении из H^1 – методом из теории экстремальных задач, при восстановлении из $H^{1/2}$ – методом подбора. Пример восстановления граничной функции d в пространстве H^1 по данным наблюдений с несколькими пропусками приведен на рисунке 10. Из рисунка 10 видно, что граничная функция d и возвышение свободной поверхности ζ восстанавливаются во всех точках открытой границы, в том числе там, где данные наблюдений отсутствуют.

Предложенный алгоритм является вычислительно интенсивным, поэтому разработаны и оттестированы несколько версий параллельных программ, реализующих данный алгоритм с помощью метода конечных элементов (МКЭ) на SMP-узловом кластере с использованием технологий OpenMP, MPI и их совмещения. Наиболее вычислительноемкой операцией в МКЭ является сборка невязки на основе локальных матриц жесткости элементов. Реализовано два способа обхода триангуляции при сборке (рисунок 11): 1) по элементам (традиционный способ, реализующий наиболее выгодное распределение памяти при хранении информации о триангуляции); 2) по узлам сетки (требуется размещения в памяти дополнительных, в общем случае, нерегулярных структур, отвечающих за хранение информации о триангуляции). Проведен сравнительный анализ эффективности и ускорения различных параллельных реализаций (рисунок 12), исследованы преимущества, недостатки каждого из подходов для разных архитектур

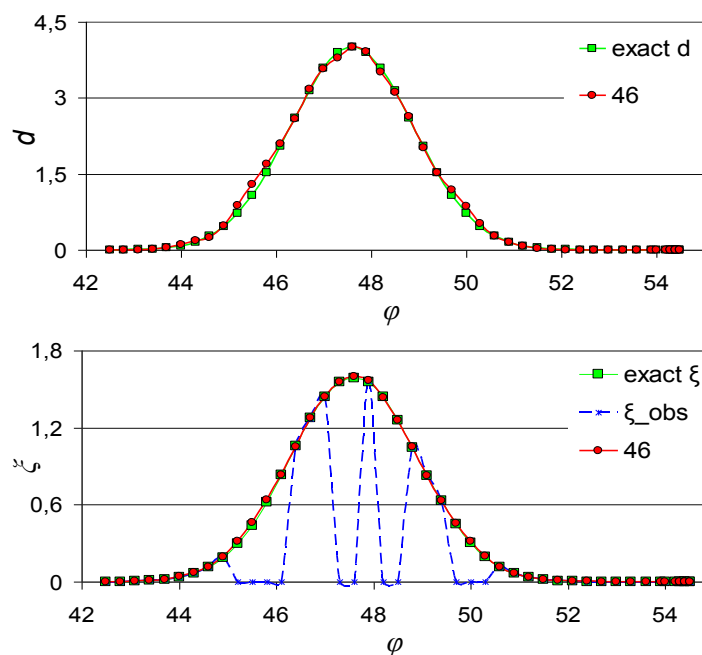


Рисунок 10 – Восстановление H^1 функций d (сверху) и ξ (снизу) на одной из открытых границ вычислительной области по данным наблюдений, заданным с пропусками

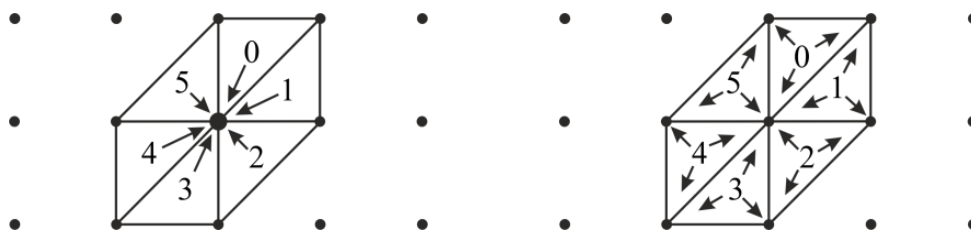


Рисунок 11 – Схема сборки невязки по узлам сетки (слева) и по элементам (справа)

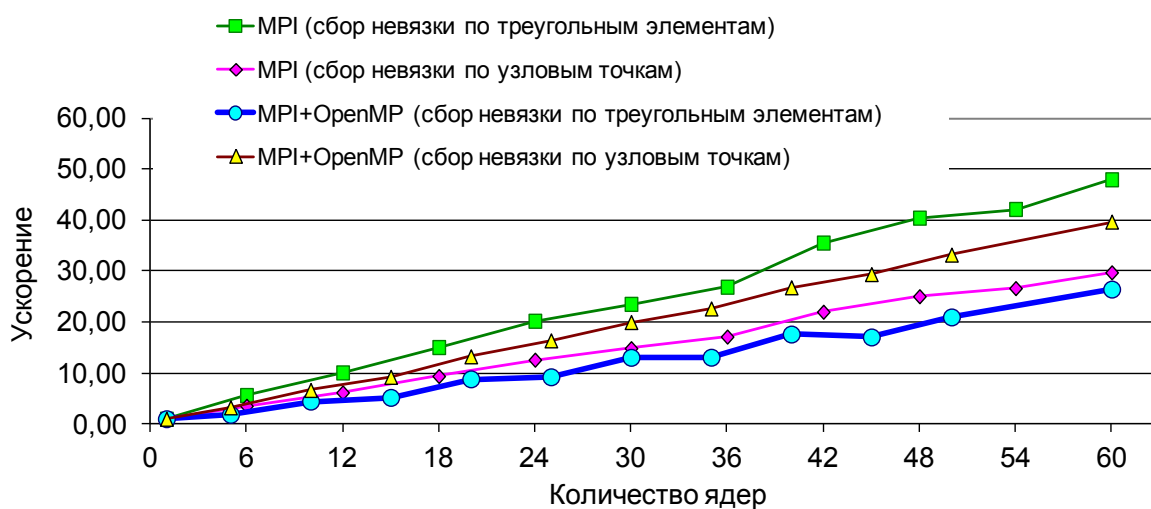


Рисунок 12 – Анализ ускорения нескольких параллельных реализаций МКЭ для задачи о граничной функции для уравнений приливной динамики

высокопроизводительных вычислительных систем.

1. *Последовательные реализации.* Численные эксперименты показали, что время выполнения последовательной программы при сборке невязки по элементам в 1,5 раза меньше, чем при поузловой сборке.

2. *Реализации для вычислительных систем (ВС) с общей памятью на основе технологии OpenMP.* Поскольку вклад в невязку в узле дают несколько треугольников, то при параллельной реализации поэлементной сборки на общей памяти будут существовать узлы сетки, которые обрабатываются разными нитями, причем, возможно, одновременно. Следовательно, в этом случае необходимы дополнительные затраты на синхронизацию нитей, которая занимает до 40% времени выполнения основного цикла, эффективность распараллеливания около 25%. При поузловой сборке невязки дополнительной синхронизации нитей не требуется, что дает явные преимущества этого подхода. Эффективность распараллеливания составляет около 90% при использовании до 30 нитей и около 80% при использовании более 30 нитей (одна нить на ядро).

3. *Реализация для ВС с распределенной памятью на основе технологии MPI.* Поскольку используется подход, связанный с декомпозицией вычислительной области без теневых граней, то при обоих способах сборки невязки на каждой итерации неизбежно возникают следующие накладные расходы: 1) время, затрачиваемое на обмены типа точка-точка между соседними процессами для сборки полной невязки на разрезах вычислительной области; 2) время на коллективную операцию глобальной редукции для расчета критерия останова итерационного процесса. Численные эксперименты показали преимущество сборки невязки по элементам. Особо следует отметить, что эта версия MPI-программы по времени выполнения выигрывает и по сравнению с самой быстрой OpenMP-версией.

4. *Совмещение технологий MPI и OpenMP для SMP-узлового кластера.* Наиболее эффективной оказалась MPI+OpenMP-версия программы при поузловой сборке невязки. Следует отметить, что она является наиболее сложной в реализации (требует создания, хранения и обработки дополнительных структур). Следует подчеркнуть, что наименьшее время выполнения показывает MPI-версия со сборкой по элементам.

7 Продолжение работ по плану Программы Президиума СО РАН «Высокопроизводительные вычисления СО РАН»

Произведена аппаратная и программная модернизация вычислительных систем общего пользования, в том числе:

– обновлено системное программное обеспечение вычислительного кластера МВС-1000 классической архитектуры;

– обновлено хранилище информации и прикладное программное обеспечение рабочей станции Flagman RX240T8.2 на основе графических вычислителей (CUDA, MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox).

Проведены работы по технической поддержке и обеспечению доступа пользователей к вычислительным ресурсам. Запущен в эксплуатацию приобретенный в 2013 году вычислительный сервер с многоядерными сопроцессорами Intel Xeon Phi (2 процессора Intel Xeon E5-2660 Sandy Bridge-EP (2200MHz, LGA2011, L3 20480Kb, 8 core), 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 5110P (8GB, 1.053 GHz, 60 core) , оперативная память –128 ГБ, HDD: 2000 TB). Пиковая производительность нового сервера составляет около 2.3 терафлопс. В отличие от специализированных программ для GPU, на нем возможно выполнение x86 совместимых программ. На этот сервер установлена среда разработки Intel Cluster Studio XE, содержащая все необходимые инструменты для создания качественных приложений с разделяемой памятью, кроме того, в нее добавлена поддержка распределенных и гибридных программ.

С целью модернизации вычислительной сети приобретены два управляемых коммутатора Gigabit Ethernet с высокой плотностью портов (D-link DGS-3620-52T, D-link DGS-1510-52), что позволило увеличить скорость доступа к сетевому хранилищу кластера.

Поддержано функционирование находящегося в совместном использовании кластера СФУ IBM System x3755. Помимо научных расчетов этот кластер обслуживает практические занятия Института математики и фундаментальной информатики СФУ по курсу «Параллельные вычисления».

Приглашенными специалистами INTEL проведены обучающие семинары для сотрудников института по возможностям и особенностям программирования с помощью пакета Intel Parallel Studio, в том числе:

- обзор новых возможностей Intel Parallel Studio XE 2015;
- мастер класс по оптимизации программ с помощью Intel Parallel Studio XE;
- практический семинар по векторизации программ с помощью OpenMP;
- структурированное программирование с использованием Intel Cilk Plus и TBB.

Эти семинары позволили повысить понимание функционирования современных процессорных технологий и освоить приемы работы с программными средствами Intel для параллельных вычислений.

Произведено обновление имеющегося программного обеспечения вычислительных кластеров, приобретено новое программное обеспечение, выполнена его установка и настройка.

Выполнен анализ статистики использования централизованных вычислительных ресурсов. Средняя загрузка кластеров по данным ведущейся статистики составляет около 67% (от 45% до 100% в разные периоды). Из общего объема около 55% загрузки дают задачи пользователей Института физики СО РАН, 39% - Институт химии и химической технологии СО РАН, 6% - Институт вычислительного моделирования СО РАН. Загрузка кластера в отдельные месяцы достигает 100% (рисунок 13) и по сравнению с 2013 годом

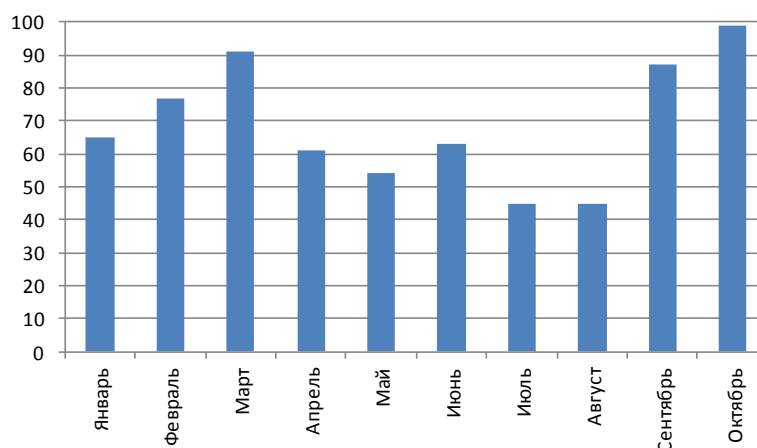


Рисунок 13 – Загрузка кластера МВС-1000/ИВМ

возросла незначительно. Часть пользователей, по прежнему, запускает отлаженные задачи на более мощных вычислительных системах в других научных центрах Новосибирска, Томска и Москвы, а также на кластере Сибирского федерального университета.

С целью обеспечения безопасного теплового режима работы кластера, все многоядерные модули (48 и 64 ядра) перенесены на вторую серверную площадку, для которой настроено транковое соединение на скорости 2 Гб/сек.

На всех вычислительных кластерах с телекоммуникационным доступом ведется статистика использования ресурсов и поддерживается телекоммуникационный доступ из научно-образовательной сети на скорости до 1 Гбит/сек, а из сетей общего пользования до 60 Мбит/сек.

В течении отчетного периода происходила тонкая настройка распределенной системы мониторинга ресурсов и отслеживания статусов запущенных сервисов ZABBIX, что позволило избавиться от ложных срабатываний системы оповещения. Статистика использования МВС-1000/146 для расчетов (топ-лист) приведена в таблице 2.

Таблица 2

Направление исследований	Запусков задач	Организация	Вклад в загрузку (%)
Молекулярная динамика	824	ИФ СО РАН	55
Молекулярная динамика	772	ИХХТ СО РАН	38
Газовая динамика	412	ИВМ СО РАН	5
Прочее	362	ИВМ, СибГТУ и др.	1
ВСЕГО	2370		100

Следует отметить четырехкратное сокращение общего количества запусков, при сохранении средней загрузки, что свидетельствует о дальнейшем уменьшении количества отладочных запусков и переходу к практическим расчетам.

За счет средств программы в 2014 приобретено сетевое Synology RackStation RS3412RPs объемом 30 ТВ. Планируется перенос на него рабочих каталогов пользователей кластера со старого файлового сервера HP Proliant DL320S.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В течение 2014 года выполнен полный цикл исследований, запланированных по данному проекту. В ходе его выполнения получены результаты, приоритет которых подтверждается рейтинговыми публикациями в ведущих Российских и зарубежных научных журналах.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Основные публикации

1. *Dementeva E., Karepova E., Shaidurov V.* Recovery of a Boundary Function by Observation Data in a Problem for the Shallow Water Model // AIP Conf. Proc. V. 1629 (2014). P. 373-380.
2. *Dementeva E., Karepova E., Shaidurov V.* Inverse Problem of a Boundary Function Recovery by Observation Data for the Shallow Water Model // Lecture Notes in Computational Science and Engineering 6, Springer-Verlag; Berlin Heidelberg, 2015, V. 103, P. 499-507.
3. *Dementeva E., Karepova E., Shaidurov V.* Effectiveness of the parallel implementation of the finite element method for the problem of the surface waves propagation // Lecture Notes in Computational Science, Springer-Verlag; Berlin Heidelberg, 2015. (In press)
4. Kirik E., Malyshev A. On validation of SigmaEva pedestrian evacuation computer simulation module with bottleneck flow // Journal of Computational Science. 2014. V. 5, Iss. 5. P. 847-850.
5. *Kirik E., Malyshev A.A.* discrete-continuous agent model for fire evacuation modeling from multistory buildings // Civil Engineering and Urban Planning III. Chapter 2. CRC Press, 2014. P. 5-8.
6. *Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V.* Modeling of elastic waves in a blocky medium based on equations of the Cosserat continuum // Wave Motion. 2015. V. 52. P. 138-150.
7. *Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Luk'yanov A.A.* Radial expansion of a cylindrical or spherical cavity in an infinite porous medium // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2014. V. 55, No. 4. P. 689-700.
8. *T. Yakubailik, L. Kompaniets* Numerical Analysis of Hydrophysical Fields in Lake Shira // Chinese Journal of Oceanology and Limnology. 2105. (In press).
9. *Александрова Н.И., Варыгина М.П., Шер Е.Н.* Моделирование распространения сейсмических волн по поверхности блочного породного массива при сосредоточенном импульсном нагружении // Интерэкспо Гео-Сибирь. – 2014. – Т. 2, № 4. – С. 115-120.
10. *Е.В. Дементьева, Е.Д. Карпова, В.В. Шайдуров.* Ассимиляция наблюдаемых данных в задаче распространения поверхностных волн в акватории с открытой границей // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2014. – V. 29 (1). – P. 13-23.

11. *Дементьева Е.В.* Восстановление граничной функции в задаче распространения поверхностных волн в открытой акватории // автореф. канд. физ.-мат. наук. – Красноярск: ИВМ СО РАН. – 16 с.
12. *Кирик Е.С., Дектерев А.А., Литвинцев К.Ю., Харламов Е.Б., Малышев А.В.* Математическое моделирование эвакуации при пожаре // Математическое моделирование. – 2014. – Т. 26, № 1. – С. 3-16.
13. *Кирик Е.С., Малышев А.В.* Тестирование компьютерных программ по расчету времени эвакуации на примере модуля SigmaEva // Пожарная безопасность. – 2014. – № 1. – С. 78-85.
14. *Кочнев В.А., Гоз И.В., Поляков В.С.* Технология расчета плотностной и скоростной моделей и статических поправок по гравиметрическим данным // Геофизика. – 2014. – № 1. – С. 2–7.
15. *Курако М.А., Диденко А.О., Симонов К.В.* Элементы системы информационной поддержки моделирования и оценки опасности цунами на ПВС // Образовательные ресурсы и технологии. Вестник Московского университета имени С.Ю. Витте. – 2014. № 1 (4). – С. 346-360.
16. *Курако М.А., Симонов К.В.* Построение аппроксимационных функций по данным наблюдений // Информатизация и связь. – 2014. – № 2. – С. 113-117.
17. *Курако М.А., Симонов К.В.* Способ оценки параметров локализованного источника цунами на основе асимптотических формул // Информатизация и связь. – 2014. – № 2. – С. 117-120.
18. *Матвеев А.Д., Гришанов А.Н.* Одно- и двухсеточные криволинейные элементы трехмерных цилиндрических панелей и оболочек // Известия Алтайского государственного университета. Математика и механика. – 2014. – Т. 81, № 1-1. – С. 84-89.
19. *Матвеев А.Д.* Применение граничных двухсеточных элементов в расчетах трехмерных композитных балок // Вестник КрасГАУ. – 2014. – № 5. – С. 44-49.
20. *Милькова И.А., Бурцев А.А., Симонов К.В.* Оценка опасности наводнений на основе логических решающих функций // Образовательные ресурсы и технологии. Вестник Московского университета имени С.Ю. Витте. – 2014. – № 1 (4). – С. 360-369.
21. *Милькова И.А., Кадена Л., Симонов К.В.* Построение экологических моделей на основе нейросетей // Образовательные ресурсы и технологии. Вестник Московского университета имени С.Ю. Витте. – 2014. – № 1 (4). – С. 369-377.
22. *Новиков Е.А., Захаров А.А.* Численное моделирование кинетики химических реакций методом Розенброка первого порядка // Вестник Тюменского государственного

- университета. Физико-математические науки. Информатика. – 2014. № 7. – С. 226-233.
23. Садовский В.М., Садовская О.В., Похабова М.А. Моделирование упругих волн в блочной среде на основе уравнений континуума Коссера // Вычислительная механика сплошных сред. – 2014. – Т. 7, № 1. – С. 52–60.
24. Садовский В.М., Садовская О.В. Вычислительный алгоритм для расчета вязкоупругих волн в среде Кельвина-Фойхта // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2014. – Т. 15, № 1. – С. 98-108.
25. Садовский В.М., Свободина К.С. О численной реализации термомеханической модели динамики упругопластической среды // Известия Алтайского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2014. – Т. 81, № 1-1. – С. 179-181.
26. Шкутин Л.И. Нелинейные деформации и катастрофы тонких тел. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2014. 139 с.
27. Якубайлик Т.В. Адаптация и верификация трехмерного численного алгоритма для расчета течений в неглубоких стратифицированных водоемах // Вестник Бурятского государственного университета. Математика Информатика. – 2014. – Т. 9, № 1. – С. 75-84.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Сведения о созданной и оформленной интеллектуальной собственности

Рогалев А.Н., Рогалев А.А. Свидетельство № 2014612317 о государственной регистрации программы “Программа оценки множеств достижимости”. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службы по интеллектуальной собственности 24.02.2014.